

Publikationsliste

Publikationen:

S. Scholl, A. Koch, D. Henning, G. Kempter, E. Kleinpeter

“The influence of Structure and Lipophilicity of Hydantoin Derivatives on Anticonvulsant Activity“

Structural Chemistry **1999**, 10, 5, 355-366

Sabrina Klod, Erich Kleinpeter

“Ab initio calculation of the anisotropy effect of multiple bonds and the ring current effect of arenes – application in conformational and configurational analysis”

Journal of the Chemical Society Perkin Trans. 2 **2001**, 1893-1898

Antje Germer, Sabrina Klod, Martin G. Peter, Erich Kleinpeter

“NMR Spectroscopic and Theoretical Study of the Complexation of the Inhibitor Allosamidin in the Binding Pocket of the Plant Chitinase Hevamine”

Journal of Molecular Modelling **2002**, 8, 231-236

Sabrina Klod, Andreas Koch, Erich Kleinpeter

“Ab initio Quantum mechanical GIAO Calculation of the Anisotropic Effect of C-C and X-C Single Bonds – Application to the ¹H NMR Spectrum of Cyclohexane”

Journal of the Chemical Society Perkin Trans. 2 **2002**, 1506-1509

Erich Kleinpeter, Andreas Koch, Sabrina Klod

“Ab initio MO-Berechnungen von NMR-Parametern zur Aufklärung von Struktur und Dynamik in Lösung”

Chemie in Potsdam – Sonderausgabe zur Bunsentagung 09. – 11. Mai 2002

Erich Kleinpeter, Sabrina Klod, Alexander Perjéssy, Mária Šamalíková, Karolina Synderlata and Zora Šusteková

„Correlation Analysis of Characteristic Infrared Spectral Data of Hydantoin Derivatives: Evidence for Vibrational Coupling“

Journal of Molecular Structure **2003**, 645, 17-27

E. Kleinpeter and S. Klod

„Ab-initio calculation of the anisotropic/ring current effects of amino acid residues to locate the position of substrates in the binding site of enzymes“

Journal of Molecular Structure **2004**, 704, 79-82

E. Kleinpeter and S. Klod

„Separation of Anisotropic and Steric Substituent Effects – Nuclear Chemical Shielding Analysis of H-4 and C-4 in Phenanthrene and 4-Ethynyl Phenanthrene“

Journal of the American Chemical Society **2004**, 126, 7, 2231-2236

Julia Hausmann, Steffen Käss, Sabrina Klod, Erich Kleinpeter, Berthold Kersting

“Binucleating Aza-Sulfonate and Aza-Sulfinate Macrocycles - Synthesis and Coordination Chemistry”

European Journal of Inorganic Chemistry **2004**, 22, 4402 – 4411

Erich Kleinpeter, Sabrina Klod and Wolf-Dieter Rudorf

„The Electronic State of Push-Pull Olefins – An Experimental Dynamic NMR and Theoretical *ab-initio* MO Study“

Journal of Organic Chemistry, **2004**, 69, 4317-4329

Matthias Heydenreich, Andreas Koch, Sabrina Klod, István Szatmári, Ferenc Fülöp and Erich Kleinpeter

“Synthesis and conformational analysis of naphth[1',2':5,6][1,3]oxazino[3,2-c][1,3]benzoxazine and naphth[1',2':5,6][1,3]oxazino[3,4-c][1,3]benzoxazine derivatives”

Tetrahedron **2006**, 62(48), 11081-11089

Erich Kleinpeter, Sabrina Klod and Andreas Koch

“Visualization of through space NMR shieldings of aromatic and anti-aromatic molecules and a simple means to compare and estimate aromaticity”

Journal of Molecular Structure: THEOCHEM **2007**, 811, 1-3, 45-60

Erich Kleinpeter, Sabrina Klod and Andreas Koch

„Endohedral and External Through-Space Shieldings of the Fullerenes C₅₀, C₆₀, C₆₀⁻⁶, C₇₀, and C₇₀⁻⁶-Visualization of (Anti)Aromaticity and Their Effects on the Chemical Shifts of Encapsulated Nuclei”

Journal of Organic Chemistry **2008**, 73(4), 1498 -1507

Vorträge:

„Experimentelle Bestimmung der Lipophilie von Hydantoinderivaten, Durchführung des Molecular Modelling der untersuchten Verbindungen, entsprechende Klassifizierung der Molekülstrukturen mit der Aussicht auf eine Struktur-Wirkung-Analyse“

Institutskolloquium des Institutes für Organische Chemie und Strukturanalytik der Universität Potsdam, 21. Dezember 1998

„NMR shielding cones of double/triple bonds and aromatic ring systems“

14. Darmstädter Molecular Modelling Workshop, Darmstadt, 30. – 31. Mai 2000

„Ab initio MO-Berechnung der Anisotropie-Effekte von Mehrfachbindungen und des Ringstromeffektes von Arenen und deren Anwendung in der Zuordnung in der Stereochemie“

GDCh-NMR-Diskussionstagung, Bochum, 15. – 16. Januar 2001

„The ring current effect of aromatic amino acids - theoretical study of the complexation of the inhibitor allosamidine to hevamine“

17. Darmstädter Molecular Modelling Workshop, Erlangen, 27. – 28. Mai 2003

„NICS *versus* NCS in der Analyse des Anisotropie-Effekts in der NMR-Spektroskopie aromatischer and antiaromatischer Moleküle“

Tag der Chemie - Wissenschaft trifft Industrie, HU zu Berlin, 24. Juni 2003

„Ab initio calculation of anisotropic effects and ring current effects - application in the nmr spectroscopy of protein-ligand interactions“

Kolloquium, FMP Berlin, 25. Juni 2003

„Kombination von NMR-spektroskopischen und quantenchemischen Methoden zur Beschreibung von Moleküleigenschaften“

Kolloquium, Uni Würzburg, 31. Juli 2003

„Beschreibung von Moleküleigenschaften mit NMR-spektroskopischen und quantenchemischen Methoden“

Kolloquium, Uni Siegen, 26. April 2004

Poster:

S. Scholl, D. Henning, A. Koch, A. Gruska, E. Kleinpeter

“Calculations of lipophilic surfaces of hydantoin derivatives using MOLCAD in comparison with experimental lipophilicities from reversed-phase HPLC – development of a model for anticonvulsive activity”

12. Darmstädter Molecular Modelling Workshop, Darmstadt, 19. – 20. Mai 1998

S. Scholl, A. Koch, D. Henning, G. Kempter, E. Kleinpeter

“Structure and Lipophilicity of Hydantoin Derivatives – a Pharmacophoric Model on their Anticonvulsive Activity”

Brno, Oktober 1999

Sabrina Klod, Erich Kleinpeter

“ π -Electron delocalisation in push-pull alkenes, NBO population analysis vs. NMR spectroscopy”

14. Darmstädter Molecular Modelling Workshop, Darmstadt, 30. – 31. Mai 2000

Sabrina Klod, Erich Kleinpeter

„Ab initio Berechnungen von Anisotropie-Effekten funktioneller Gruppen und aromatischer Ringe“

15. Darmstädter Molecular Modelling Workshop, Darmstadt, 22. – 23. Mai 2001

Sabrina Klod, Erich Kleinpeter

„NBO-Analyse einer Reihe von Modellverbindungen von Pushpull-Alkenen – Abschätzung von Donor- und Akzeptorstärken“

16. Darmstädter Molecular Modelling Workshop, Darmstadt, 07. – 08. Mai 2002

A. Koch, S. Klod, E. Kleinpeter

„Ab initio Berechnungen von NMR spektroskopischen Daten – NBO 5.0 Populationsanalyse“

16. Darmstädter Molecular Modelling Workshop, Darmstadt, 07. – 08. Mai 2002

A. Koch, S. Klod, E. Kleinpeter

„NICS *versus* NCS in analysing anisotropic effects in NMR spectroscopy of aromatic and antiaromatic molecules“

17. Darmstädter Molecular Modelling Workshop, Erlangen, 27. – 28. Mai 2003

Sabrina Klod, Erich Kleinpeter

“Ring current effects in fullerenes - a theoretical study”

45. Experimental NMR Conference (ENC), Pacific Grove, Californien/USA, 18. – 23. April 2004

Sabrina Klod, Erich Kleinpeter

“Theoretical calculations of ring current effects in fullerenes”

18. Darmstädter Molecular Modelling Workshop, Erlangen, 18. – 19. Mai 2004